

# 数値計算言語 Octave による土壌水分特性曲線の 非線形回帰プログラム

関 勝 寿\*

A Program for Nonlinear Fitting of Soil Water Retention Curve Written  
in Numerical Calculation Language GNU Octave

Katsutoshi SEKI\*

\* Graduate School of Agricultural and Life Sciences, The University of Tokyo,  
1-1-1 Yayoi, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8657, Japan

## Abstract

The soil hydraulic parameters for analyzing soil water movement can be determined by fitting a soil water retention curve to a certain function, i.e., a soil hydraulic model. For this purpose, a program which performs nonlinear fitting of soil water retention curves to 4 models, Brooks and Corey model, van Genuchten model, Kosugi's lognormal pore-size distribution model, and Durner's bimodal pore-size distribution model, by Levenberg-Marquardt method was developed. The program was written in GNU Octave, a high-level language primarily intended for numeric calculation. It was shown that the developed program actually works fine with many soil water retention curves in UNSODA database. It was also shown that by comparing coefficients of determination and fitting curves of each model, the most appropriate hydraulic model for a certain soil can be selected. Therefore this program not only calculates the necessary parameters, but also helps determining which model is to be used for a particular purpose.

**Key words :** Soil water characteristic curve, Nonlinear regression, Octave

## 1. はじめに

土壌水分特性とは、土壌中にかかる負圧、すなわちサクション  $h$  と、体積含水率  $\theta$  の関係である。ここで、サクションとは土壌中のマトリックポテンシャル  $\phi_m$  に対し、 $h = -\phi_m = |\phi_m|$  で与えられる。 $h$  と  $\theta$  の間には様々な関係式、すなわち土壌水分特性モデル  $\theta(h)$  が提案されている。土壌水分特性曲線の測定法には、土柱法、吸引法、加圧板法、サイクロメーター法等がある(中野ら, 1995)。測定された土壌水分特性曲線を、土壌水分特性モデル  $\theta(h)$  に近似することで、関数  $\theta(h)$  に含まれるパラメータを決定し、水分移動解析が可能となる。そのため非線形回帰の計算には、Microsoft Excel のソルバー機能を使う方法(登尾, 2004)やグラフソフト・統計ソ

フトの非線形回帰機能を使って計算する方法があるが、こういった一般的な非線形回帰ツールでは、パラメータの初期値や制約条件を適切に定めないと、適切な値に収束しない場合がある。したがって、関数の特性に応じてパラメータを定めるプログラムがあれば便利である。土壌水分特性モデルに特化した非線形回帰プログラムには、US Salinity Laboratory が開発した RETC (van Genuchten *et al.*, 1991) があるが、RETC においても、初期値自動設定の機能はない。

そこで、モデルの特性に応じて自動的にパラメータの初期値を定めて非線形回帰計算により最適パラメータが計算されるようなプログラムを作成し、フリーソフトとして公開した。プログラムの開発には、高度な数値計算インタプリタ言語である GNU Octave を使った。さら

\* 東京大学大学院農学生命科学研究科 〒113-8657 東京都文京区弥生 1-1-1

キーワード: 土壌水分特性曲線, 非線形回帰, Octave

に、土壌水文データベース UNSODA に登録されているデータを用いて、プログラムの動作を検証した。

## 2. 理 論

土壌水分特性曲線の近似式  $\theta(h)$  には、数多くのモデルが提案されている。その中でも、この論文では比較的広く用いられている Brooks and Corey 式 (BC 式), van Genuchten 式 (VG 式), Kosugi の間隙径対数正規分布式 (LN 式), Durner の間隙径バイモーダル分布式 (DB 式) の 4 つのモデルを取り上げる。Brooks and Corey (1964) は、土壌水分特性曲線について以下の近似式 (BC 式) を提案した。

$$S_e = \begin{cases} \left(\frac{h}{h_b}\right)^{-\lambda} & (h > h_b) \\ 1 & (h \leq h_b) \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 $h$  はサクション (cm),  $h_b$  は空気侵入値 (cm),  $\lambda$  は土壌特性パラメータである。また、 $S_e$  は

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (2)$$

によって定義される有効飽和度であり、 $\theta$  は体積含水率、 $\theta_s$  は飽和体積含水率、 $\theta_r$  は残留体積含水率である。(1) 式は  $h$  と  $S_e$  の関係式  $S_e(h)$  であるが、(2) 式を代入することで、 $\theta(h)$  が得られる。したがって、以下  $S_e(h)$  を  $\theta(h)$  と等価に扱う。なお、 $\theta_r = 0$  とすることで、(1) 式は Campbell (1974) の式と等しくなる。

土壌水分特性は、土壌の間隙構造を反映しているため、同様に間隙構造を反映する透水係数との間に関連づけが試みられてきた。その関係について、Mualem (1976) は、

$$K_r = S_e^2 \left[ \frac{f(S_e)}{f(1)} \right]^2, \quad f(S_e) = \int_0^{S_e} \frac{1}{h(x)} dx \quad (3)$$

とした。ここで、 $h(x)$  は  $Se(h)$  の逆関数、 $\tau$  は間隙の連続性をあらわすパラメータ、ここでは屈曲度で、Mualem (1976) は多くの研究者の測定結果から平均的に  $\tau = 0.5$  であるとした。 $K_r$  は相対透水係数で、サクション  $h$  における不飽和透水係数  $K$  を飽和透水係数  $K_s$  で割った値である。(1) 式から、 $S_e(h)$  の逆関数  $h(S_e)$  を計算できるため ( $h(1) = h_b$  とすれば  $h = h_b S_e^{-1/\lambda}$ )、(3) 式から相対透水係数を

$$K_r = \begin{cases} \left(\frac{h}{h_b}\right)^{-(2+\tau\lambda+2\lambda)} & (h > h_b) \\ 1 & (h \leq h_b) \end{cases} \quad (4)$$

と計算できる。このように、関数  $h(S_e)$  を決定できれば、 $\tau$  の値を決めることで、Mualem 式から  $K_r(h)$  を決定することが可能である。

その後、van Genuchten (1980) が提案した以下の式 (VG 式) は、現在広く使われている大変有名な式である。

$$S_e = \left[ \frac{1}{1 + (\alpha h)^n} \right]^m \quad (5)$$

ここで、 $\alpha, n, m$  ( $\alpha > 0, n > 1, 0 < m < 1$ ) は定数で、 $m = 1 - 1/n$  の関係式が良く用いられる。(5) 式は、 $\alpha h \gg 1$  のときに

$$S_e = (\alpha h)^{-mn} \quad (6)$$

と近似され、BC 式において、 $h_b = 1/\alpha, \lambda = mn = (1 - 1/n)n = n - 1$  としたものと同一になる。さらに、van Genuchten (1980) は、 $m = 1 - 1/n$  の拘束条件を与えれば、(5) 式から  $h(S_e)$  が決まるとして、(3) 式を解いて以下の式を得た (van Genuchten は  $\tau = 0.5$  として計算しているが、ここでは  $\tau$  をそのまま残した式を示す)。

$$K_r = S_e^2 [1 - (1 - S_e^{1/m})^m]^2 \quad (7)$$

この式に (5) を代入することで、 $K_r$  を  $h$  の関数として表現できる。

Kosugi (1994) は、土壌の間隙径分布が対数正規分布であるという仮定の下で、土壌水分特性モデルを作成した。使用したパラメータは、空気侵入値、間隙径分布の中央値と標準偏差の 3 つである。そのモデルを元に、Kosugi (1996) は、空気侵入値を 0 としても十分に良好な近似ができるとして、パラメータを 1 つ減らした以下の式 (LN 式) を提案した。

$$S_e = Q \left[ \frac{\ln(h/h_m)}{\sigma} \right] \quad (8)$$

ここで、 $h_m$  は間隙径分布の平均をあらわすパラメータで、 $\sigma$  は間隙径分布の標準偏差をあらわすパラメータである。サクション  $h_m$  に対応する中央間隙径 (半径)  $r_m$  は、 $r_m \approx 0.15/h_m$  と計算できるため、どの大きさの間隙径が卓越しているかを知ることができる。また、 $Q(x)$  は標準正規分布関数の余関数である。平均が 0、標準偏差が 1 の標準正規分布の確率密度関数  $f(x)$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad (9)$$

に対する累積密度関数、すなわち標準正規分布関数  $N(x)$  は

$$N(x) = \int_{-\infty}^x f(t) dt \quad (10)$$

と定義され、その余関数  $Q(x)$  は

$$Q(x) = \int_x^{\infty} f(t) dt = 1 - N(x) \quad (11)$$

である。さらに、Kosugi (1996) は相対透水係数に関し

て

$$K_r = S_e^2 \left\{ Q \left[ \frac{\ln(h/h_m)}{\sigma} + \sigma \right] \right\}^2 \quad (12)$$

との関係を得た ( $\tau=0.5$ )。BC 式と VG 式は経験式であるのに対し、LN 式は各パラメータが間隙構造と関連した物理的意味を持っているところに、LN 式の特徴がある。また、Kosugi (1997) は、飽和透水係数  $K_s$  (cm/s) について、

$$K_s = B \frac{\exp(\sigma^2)}{h_m^2} \quad (13)$$

の関係があるとし、森林土壌の測定値から、 $B=10^{0.4}$  cm/s とした。

BC 式, VG 式, LN 式のパラメータについて表-1 にまとめる。パラメータ 1 と 2 は、体積含水率を有効飽和度に変換して、無次元化するためのパラメータである。パラメータ 3 は、サクション  $h$  を無次元化するためのパラメータである。パラメータ 1~3 により  $h$  と  $\theta$  を無次元化してグラフを描くと、その曲線の形がパラメータ 4 によって決まる (図-1)。このような無次元座標軸のグラフと比較することで、与えられた土壌水分特性曲線のパラメータを大まかに推定することができる。

Durner (1994) は、これまでの式のように土壌間隙径分布が 1 つのピークを持っている (ユニモーダルである) 土壌に対するモデルは、土壌間隙径分布が不均一な土壌を十分に表現できない場合があるとして、複数のピークを持つ (マルチモーダルな) 土壌に対する土壌水分特性モデルを以下のように VG 式の線形結合にて記述した。

$$S_e = \sum_{i=1}^k w_i \left[ \frac{1}{1 + (\alpha_i h)^{n_i}} \right]^{m_i} \quad (14)$$

ここで、 $0 < w_i < 1$ ,  $\sum w_i = 1$  である。この Durner のマルチモーダルモデルについて、特に  $k=2$  の以下の式、すなわち土壌間隙径分布のピークが 2 つあるとするバイモーダルモデルを、Durner のバイモーダル式 (DB 式) とする。

$$S_e = w_1 \left[ \frac{1}{1 + (\alpha_1 h)^{n_1}} \right]^{m_1} + (1 - w_1) \left[ \frac{1}{1 + (\alpha_2 h)^{n_2}} \right]^{m_2} \quad (15)$$

Durner (1994) は  $m_i = 1 - 1/n_i$  の拘束条件を明示的には指定していないが、ここでは  $m_i = 1 - 1/n_i$  と指定する。 $h$  ( $S_e$ ) の解析的な (closed-form の) 式は与えられていないため、Mualem 式による  $K_r(h)$  の計算は数値的に行う必要がある。DB 式は、パラメータの数が 7 つあり、非常に自由度の高い式である。

このように、BC 式, VG 式, LN 式によって土壌水分特性パラメータを得ると、Mualem 式により相対透水係

表-1 土壌水分特性モデルとパラメータ

Table 1 Soil hydraulic models and parameters

モデル	パラメータ			
	1	2	3	4
BC	$\theta_s$	$\theta_r$	$h_b$	$\lambda$
VG	$\theta_s$	$\theta_r$	$\alpha$	$n$
LN	$\theta_s$	$\theta_r$	$h_m$	$\sigma$

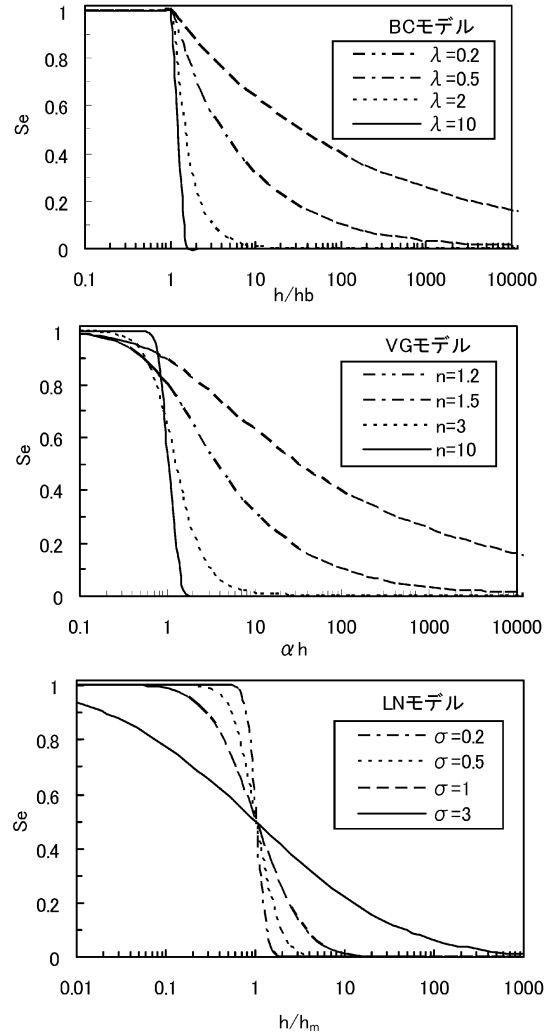


図-1 土壌水分特性モデルの無次元座標グラフによる比較

Fig. 1 Comparison of soil hydraulic models by dimensionless parameters

数  $K_r(h)$  を推定できる。したがって、飽和透水係数の値が決まれば、不飽和透水係数  $K(h)$  が定まり、水分容量  $C(h) = d\theta/dh$  および水分拡散係数  $D(\theta) = K(\theta) dh/d\theta$

も定まる。初期条件と境界条件が与えられれば, Richards 式を解いて, 水分移動を解析することができる。このように, 土壌中の水分移動解析の際には, 土壌水分特性パラメータを決定することが重要となる。

### 3. 計算方法

#### 3.1 非線形最小二乗法

土壌水分特性モデル  $\theta(h)$  について, 独立変数  $h$  を  $x$ , 従属変数  $\theta$  を  $y$  と書き直す。また, 関数に含まれるパラメータをベクトル表記したものを, パラメータベクトル  $\mathbf{p}$  とする。たとえば, BC 式の場合は,  $\mathbf{p}=(\theta_s, \theta_r, h_b, \lambda)$  と書くことができる。このときに, モデル関数を

$$E(y)=f(x, \mathbf{p}) \quad (16)$$

と記述できる(独立変数の数は, ここでは 1 つであるが, 一般には, 複数でも良い)。ここで,  $E(y)$  はモデルによって予測される従属変数  $y$  の値である。測定データの組を  $(x_i, y_i)$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) と書くとき, 測定データ  $y_i$  と (16) 式により予測される値  $E(y_i)$  の誤差の二乗和  $\Phi$  を

$$\Phi=\sum_{i=1}^n|y_i-E(y_i)|^2 \quad (17)$$

と書くことができる。この  $\Phi$  の値を最小とするように  $\mathbf{p}$  を定めることが, 最小二乗法である。BC 式, VG 式, LN 式, DB 式のように, モデル関数  $f(x, \mathbf{p})$  が  $\mathbf{p}$  に対して非線形の場合には,  $\Phi$  の等高線 (contour) にねじれが生じ,  $\Phi$  は多次元パラメータ空間内で複雑な挙動を示す。 $\Phi$  は一般に多数の局所的な最小点を持つため, 大域的な最小解を求めるのは難しい。しかしながら, なんらかの方法でおおまかな解が推定されれば, それを初期値に与えることで, 初期値近傍の極小解を求めるためのいくつかのアルゴリズムがある。その中でも, Marquardt (1963) が開発したレーベンバーグ・マルカート法は, ガウス・ニュートン法の良い性質, すなわち, 極小解の近傍にて急速に収束するという性質と, 勾配法の良い性質, すなわち, 極小解から離れた初期値を与えても極小解に収束しやすいという性質を兼ね備えるように開発された優れたアルゴリズムである。

#### 3.2 Octave による土壌水分特性計算プログラム

レーベンバーグ・マルカート法によって土壌水分特性パラメータを決定するプログラムを, GNU Octave<sup>1</sup> (以下 Octave と記述) にて作成した。大石 (2000) によれば, 近代数値計算の祖の一人である James Hardy Wilkinson (1919-1986) が開発した線形計算用の FORTRAN

プログラム集が LINPACK, EISPACK としてまとめられ, それが LAPACK となった。LAPACK を元に, MATLAB, Octave, Scilab などの使いやすい数値計算インタプリタ言語が開発された。MATLAB は, MathWorks 社が開発している非常に高品質の商用数値計算言語であり, MATLAB の仕様を元に作られたオープンソースの数値計算用インタプリタ言語が, Octave と Scilab である。信頼性の高い数値計算プログラムを作成するためには, このように多くの数値計算の専門家によって長い時間をかけて開発されてきた数値計算用の言語を用いることが有効となる。

以上の理由により, 土壌水分特性パラメータ決定プログラムを, Octave によって作成した。したがって, プログラム実行のためには, まず Octave をインストールする必要がある。Octave のホームページに, Windows, Mac OS X, Linux 等の OS ごとに, インストールの方法が書かれている。

作成した土壌水分特性計算プログラムを付録に掲載する。また, 専用のホームページ<sup>2</sup>から付録に掲載したものと同一プログラム (swrc.m) とサンプルデータ (swrc.txt) をダウンロードすることができる。Octave 上で swrc.m を実行すること, 図-2 のように 3 つの土壌水分特性モデル (BC 式, VG 式, LN 式) による土壌水分特性パラメータが表示される。DB 式による近似には, バイモーダルモデル専用のプログラム bimodal.m をダウンロードし, 実行する。DB 式近似のプログラムは, 長いため付録には掲載していない。

データファイル swrc.txt の中身を変えて実行することで, 任意の土壌水分特性データに対する土壌水分特性パラメータを計算できる。データは, スペース区切りのテキストファイルで, 1 列目にサクションを, 2 列目に体積含水率を入力する。入力するデータの単位についてはプログラムは関知しないため, どのような単位を用いても構わない。ただし, 計算結果の単位は入力単位に依存し, たとえばサクションを cm 単位で入力すれば  $\alpha$  の単位は  $\text{cm}^{-1}$  となる。データ以外のコメントを入れる場合には, 行頭に # マークを記入する。データファイルのファイル名は, 常に swrc.txt とする。

計算チェック用の Microsoft Excel ファイルをダウンロードして, ワークシートの指定された箇所に測定値と計算結果をコピーすることで, 測定値と近似曲線をグラフで確認することが出来る。

#### 3.3 BC 式, VG 式, LN 式の計算手順

付録に掲載したプログラム (swrc.m) にしたがって,

<sup>1</sup> <http://www.gnu.org/software/octave/>

<sup>2</sup> <http://purl.org/net/octave/>

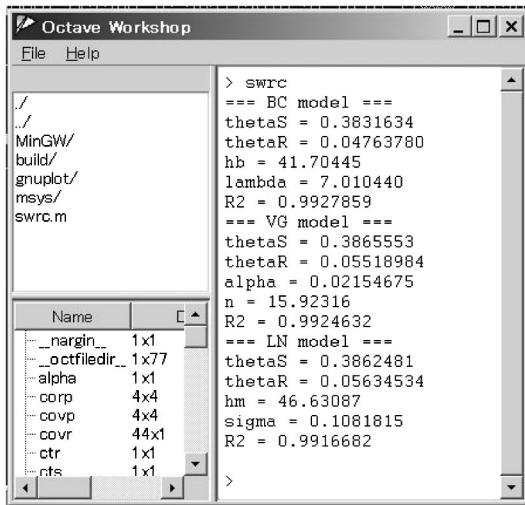


図-2 Octave Workshop による土壌水分特性パラメータ決定プログラムの実行画面

Fig. 2 Screenshot of the program running on Octave Workshop

BC 式, VG 式, LN 式の計算手順を示す。5 行目から 10 行目までにおいて, データファイル (swrc.txt) からデータを変数 swrc に行列として読み込み, 1 列目のサクションを変数  $x$  に, 2 列目の体積含水率を変数  $y$  に, それぞれ列ベクトルとして格納する。その際に, サクションの小さい値から順番にデータが並ぶように並び替えをしている (8~10 行目)。

$\theta_s$  と  $\theta_r$  は, パラメータすなわち変数として扱われるが, 定数とすることも可能である。その設定は, 12 行目から 16 行目までの「#Setting」ブロックをテキストエディタによって書き換えることで行う。13 行目では,  $\theta_s$  の初期値を体積含水率の最大値として設定している。この値を, 測定値に書き換えることができる。14 行目では,  $\theta_s$  を変数とするか定数とするかを設定する。ここを「cts=0;」と書き換えることで,  $\theta_s$  が定数となる。同様に,  $\theta_r$  を定数とすることも可能である。たとえば  $\theta_r=0$  と設定するためには, 16 行目の後に  $\theta_{rRin}=0$ ; ctr=0; と記述する。この場合, BC 式は Campbell (1974) の式と等しくなるので, Campbell パラメータの決定が可能となる。

続いて, 18~28 行目において変数の初期値を設定する。BC 式計算の初期値について, 空気侵入値  $h_b$  は有効飽和度  $S_e$  が 0.95 を超える点のサクションから推定している (20~22 行目)。また, 2 点間の両対数グラフの傾きから, (1) 式より  $\lambda$  の値を推定し (26 行目),  $0.1 \leq \lambda \leq 10$  となるように調整 (27~28 行目) したものを初期値とする。

30~44 行目において, BC 式の計算をする。プロットに  $x=0$  があると計算エラーを起こすため,  $x=0$  のときは  $x=0.001$  と修正したものを  $x2$  とする (32 行目)。33~35 行目において, BC 式の関数が定義される。34 行目において,  $x$  はサクションデータの列ベクトルで,  $p$  はパラメータベクトル ( $\theta_s, \theta_r, h_b, \lambda$ ) である。すなわち,  $\theta_s$  が  $p(1)$ ,  $\theta_r$  が  $p(2)$ ,  $h_b$  が  $p(3)$ ,  $\lambda$  が  $p(4)$  である。式 (1) の  $h > h_b$  という条件は, ( $x > p(3)$ ) にて与えている。これは,  $x$  が  $p(3)$  よりも大きい時に 1, そうでなければ 0 を与える関数である。また,  $x$  はベクトルであるため, スカラーによるかけ算をするときに, \* の前に . (ドット) を書く。ドットを省略すると, ベクトルとベクトルの内積とみなされる。割り算, べき乗についても同様である。関数の定義ができたところで, 40 行目にて leasqr 関数による非線形最小二乗法計算を実行する。

[f, p, kvg, itr, corp, covp, covr, std, z, R2]=leasqr (x, y, pin, "BC", stol, niter, wt, dp);

ここで, 入力変数は,  $x$  と  $y$  に測定データベクトル, すなわち,  $x$  にサクション,  $y$  に体積含水率を, pin には, パラメータの初期値を, "BC" には関数の名前を指定する。stol は, 収束判定のための誤差範囲の指定である。最初は 1 として, 徐々に小さくして精度をあげている (39~43 行目の while~endwhile ループ)。収束しない場合には, 直前に収束した時の値を結果として返す (41 行目)。niter は最大反復回数で, 20 としている。wt は, データの重みづけを指定するベクトルである。dp は, パラメータの増分割合を指定する。値を大きくする方が, パラメータの値が変動しやすくなる。0 を指定すると, 定数として扱われる。dp=[0.00001\*cts 0.001\*ctr 0.1 0.01] として (38 行目), cts または ctr に 0 が設定されると,  $\theta_s, \theta_r$  がそれぞれ定数となる。 $\theta_s$  の値は大きく変化させないため, 変動幅を小さくした。 $h_b$  の変動幅を他のパラメータよりも大きく設定し, 空気侵入値を優先的に決定させようとしている。Leasqr 関数には, 他にも設定できる入力値があるが, 省略している。戻り値の意味は, f は関数計算に用いられる関数名, p は決定されたパラメータ, kvg は計算が収束すれば 1, 収束しなければ 0 となる変数, itr から Z までは使用してないが, 最後の R2 (重決定係数) を得るために記述している。

VG 式 (46~65 行目), LN 式 (67~84 行目) も, BC 式と同様に計算される。LN 式において, 関数 normcdf (70 行目) は, 式 (10) の標準正規分布関数  $N(x)$  である。ここで, 初期値の推定には, VG 式の場合には BC 式の計算結果, LN 式の場合には VG 式の計算結果を使い, それぞれ  $n=\lambda+1$ ,  $\sigma=1.2(n-1)^{-0.8}$  としている (54 行目, 73 行目)。前者は式 (6) から理論的に導き, 後者は以



下のように定めた。VG 式にて、 $\theta_s=1$ ,  $\theta_r=0$ ,  $\alpha=1$  として、 $n$  の値を変化させた曲線に対し、LN 式にて近似をしたところ、 $n-1$  と  $\sigma$  の両対数グラフが直線となった ( $R^2=0.998$ )。この回帰式から、 $n$  と  $\sigma$  の関係を定めた。このように、土壌水分特性曲線の一般的な形から、BC 式、VG 式、LN 式と順次自動的に初期値を定めて計算を実行するところにこのプログラムの特徴がある。

パラメータの拘束条件として明示的に与えているのは、 $\alpha \geq 0$ ,  $n \geq 1$ ,  $h_m \geq 0$ ,  $\sigma \geq 0$  である。物理的な意味を考えると、 $\theta_r \geq 0$  の拘束条件を与えるべきであるが、ここでは  $\theta_r$  をフィッティングパラメータと考え、拘束条件を与えていない。

### 3.4 DB 式の計算手順

続いて、DB 式のプログラム (bimodal.m) の計算手順を示す。DB 式はパラメータが 7 個あるため、自由度が非常に高く、多くの局所的最小点を持つ。したがって、適切な値に収束するように初期値を定めることが困難である。そこで、以下のような手法で段階的にパラメータの決定をしている。まず、式 (5) の右辺第 1 項、すなわち  $\alpha_1$  と  $n_1$  を決定するために、サクションの小さい方から  $i$  個 ( $3 \leq i \leq n-1$ ;  $n$  はデータプロットの数) のデータについて、VG 式による回帰をする。次に、測定データからこの回帰式を引いて、VG 式による回帰をすることで、式 (5) の右辺第 2 項を定め、式 (5) のパラメータをすべて決定する。なお、 $3 \leq i \leq n-1$  と定めたのは、 $i=1, 2$  の時には、VG 式による回帰が不可能であり、 $i=n$  の時には、2 回目の VG 式近似に「2 つ目の間隙径ピーク」という意味がなくなるためである。2 回目の回帰における重決定係数の値が最大となる  $i$  の値における近似が、最良の近似であるとして、この値を初期値に用いて、DB 式の全パラメータを回帰する。

最終的に得られた値について、 $w_1$  は式 (5) の第 1 項の寄与をあらわすため、 $w_1 < 0.01$  のときは第 2 項のみのユニモーダルモデルで、 $w_1 > 0.99$  のときは第 1 項のみのユニモーダルモデルで、それぞれ近似したものとはほぼ等しくなる。そこで、そのような  $w_1$  の値が得られたときには、「Not bimodal」とだけ表示することとした。

このように慎重にパラメータの決定をしても、なおパラメータは発散しやすい。特に、 $n_i$  の値に関しては、大きい値に発散することがあり、上限値を設けておくことが望ましい。そこで、 $1 \leq n_i < 50$  の制約条件をつけた。

## 4. 結 果

### 4.1 UNSODA データベースによる検証

作成したプログラムの検証のために、不飽和土壌水文特性データベース UNSODA (Nemes *et al.*, 2001) の

データを用いた。ここで、検証とは多くの実験データに対し、このプログラムが適切に動作することを確認することを目的とする。通常、非線形回帰プログラムでは初期値の設定はユーザーに任されており、適切な初期値の設定についてプログラムは責任を負わない。ところが、このプログラムは初期値の自動設定に特徴があり、そのアルゴリズムが適切でない場合には、適切に初期値を選択すれば収束するような実験データに対して、収束が得られなかったり、大域的最適解よりも近似精度がはるかに低い局所最適解が得られる可能性がある。そこで、汎用的な動作を保証するためには、多くの実験データに対してこのプログラムを実際に動かし、適切な値に収束するように、初期値設定アルゴリズムやパラメータの制約条件の与え方、パラメータの増分割割  $dp$  等を、調整する必要がある。UNSODA データベースの中で、土壌水分特性曲線 (実験室、脱水過程) が登録されているものは 728 個あり、これらのデータに対して、このような調整作業を繰り返した結果、そのすべてに対して BC 式、VG 式、LN 式近似の収束が得られるようなプログラムを開発することができた。すなわち、本研究において、プログラム開発と検証は同時進行した。UNSODA データベースの中には、データが非常にばらついているものもあったが、そのようなデータに対しても、近似曲線を確認すると妥当な近似曲線が得られていることが確認された。また、以下に示すように全体的に近似の精度が高かったことは、不適切な初期値設定による不適切な値への収束が少なかったことを意味する。

UNSODA データベース 728 個のデータの中で、BC 式、VG 式、LN 式すべてにおいて  $R^2 > 0.99$  の良い結果が得られたものは 344 個あった。ただし、測定点数が少ないものについては、重決定係数が高いことが必然である場合もあるため、特に土壌水分特性曲線のプロットが 10 点以上ある 420 個のデータについて調べると、BC 式、VG 式、LN 式すべてにおいて  $R^2 > 0.99$  の良い結果が得られたものは 186 個であった。これをモデルごとに見ると、この 420 個の中で、 $R^2 > 0.99$  の良い近似が得られたものは BC 式では 224 個、VG 式では 282 個、LN 式では 286 個となり、全体的な傾向としては、BC 式よりも VG 式、LN 式の方が良く近似ができた。420 個の近似すべての重決定係数の平均は、BC 式では 0.9775、VG 式では 0.9831、LN 式では 0.9836 となった。このように、このプログラムが幅広いタイプの土壌水分特性曲線に対し、BC 式、VG 式、LN 式による土壌水分特性パラメータを決定することができ、多くのデータに対して高い重決定係数が得られることが確認できた。ただし、重決定係数によるモデル間の比較は、あくまでも多くの実験データ

に対する平均的な値の比較であり、参考値にすぎない。個々のデータに対しては、4.2 節で示すように、複数のモデルにて近似曲線を描いて比較し、解析の目的に応じてどのモデルを選択するかを決定することが望ましい。

間隙径ユニモーダル分布モデルで十分に良好な近似が得られる場合には、バイモーダルモデルで近似をする必要性が生じない。そこで、まず DB 式計算の検証のためのデータを抽出した。420 個のデータの中で、BC 式、VG 式、LN 式のすべてで  $R^2 < 0.99$  となったデータは 98 個、 $R^2 < 0.98$  となったデータは 48 個となった。この 48 個のデータに対して、bimodal.m を実行して DB 式による近似をした。その中で、 $0.01 < w_1 < 0.99$  となり「Not bimodal」表示が出なかったものは 42 個あった。その 42 個のデータの中で、重決定係数の平均は、BC 式では 0.902、VG 式では 0.906、LN 式では 0.913 であるのに対し、DB 式では 0.945 となり、より良い近似が得られた。この中で、DB 式の重決定係数が 0.98 以上となったものは 23 個、0.99 以上となったものは 19 個あった。このように、UNSODA データベース 420 個の土壌試料の中で、明らかにユニモーダル式を使うよりも DB 式を使うと良い近似が得られると判断された土壌試料が 20 個程度あった。それらの試料は、主にローム土壌で、測定されているサクションの範囲が大きいという特徴を持っていた。

#### 4.2 計算例および土壌水分特性モデルの比較

UNSODA データベースの中で、表-2 に示すような、いくつかの特徴的な試料について、計算結果を示す。表-2 の試料について、swrc.m によって得られた BC 式、VG 式、LN 式による土壌水分特性パラメータを表-3 に示す。

試料 1 の砂質土 (Haverkamp and Parlange, 1986) については、BC 式、VG 式、LN 式ともに良好な近似 ( $R^2 > 0.98$ ) が得られた (図-3)。このように、空気侵入値か

らサクションの増加とともに急激に体積含水率が低下する砂質土の土壌水分特性曲線については、測定されているサクションの範囲が小さければ、いずれの式も良好な近似を得ることができる。ただし、サクションの範囲が大きい場合には、必ずしも BC 式、VG 式、LN 式で良好な近似が得られないことに注意する必要がある (Mehta *et al.*, 1994)。図-3 のように、BC 式よりも、VG 式、LN 式の方が空気侵入値付近の曲線形を良く再現しているため、より良好な近似 (高い重決定係数) が得られた。

試料 2 の砂質ローム土 (Laliberte *et al.*, 1966) では、BC 式、VG 式、LN 式ともに良好な近似 ( $R^2 > 0.99$ ) が得られた (図-4)。この試料に関しては、BC 式の近似が特に良好で、 $R^2 = 0.99978$  であった。図-3 のように、BC 式よりも VG 式、LN 式が良く適合するものが多い中で、このように BC 式の方がよく近似ができる場合もある。グラフからは、どのモデルも良好な近似が得られ、いずれを選択しても大差ないようにも見えるが、透水係数を推定する場合には、飽和に近い領域の推定が特に重要であるため、この領域の適合性を軽視することはできない。Durner (1994) によれば、飽和から空気侵入値までの領域での近似曲線の形状の相違が、 $K_r$  の推定値に 10 倍程度の差をもたらす場合があり得る。したがって、この試料の場合には、飽和から空気侵入値までの水分量変化を正確に表現できる BC 式を用いることが望ましい。

試料 3 のローム砂 (Dane *et al.*, 1983) においても、BC 式、VG 式、LN 式ともに良好な近似 ( $R^2 > 0.99$ ) が得られた (図-5)。なお、 $h=0$  の値が対数グラフ上に表示できないため、 $h=1$  として表示した。測定データの形を見ると、若干バイモーダルな特性を帯びているようにも見えるが、測定されたサクションの範囲があまり広くないこともあり、DB 式を用いるまでもなく、ユニモーダルな BC 式、VG 式、LN 式にて十分に良好な近似が得られた。

表-2 土壌試料の物理特性

Table 2 Soil physical properties of soils

試料	土性	飽和透水係数 ( $\times 10^{-3}$ cm/s)	間隙率	土壌採取地と文献	UNSODA ID
1	砂	2.22	0.430	Grenoble, France Haverkamp and Parlange, 1986	4440
2	砂質ローム	1.57	0.518	Hanford, WA, USA Laliberte, 1966.	2243
3	ローム砂	0.699	0.350	Union Springs, AL, USA Dane <i>et al.</i> , 1983.	1015
4	シルト質ローム	4.26	0.562	Lyss, Switzerland Richard <i>et al.</i> , 1983.	2760

表-3 土壌試料の土壌水分特性パラメータ

Table 3 Soil hydraulic parameters of soils

試料 <sup>1)</sup>	モデル	パラメータ <sup>2)</sup>				R <sup>2</sup>
		1	2	3	4	
1	BC	0.344	-0.0105	36.0	1.25	0.982
	VG	0.348	0.104	0.0203	6.56	0.994
	LN	0.347	0.109	50.7	0.261	0.993
2	BC	0.516	0.113	35.2	1.56	0.9998
	VG	0.526	0.155	0.0208	4.57	0.993
	LN	0.524	0.161	52.0	0.386	0.993
3	BC	0.263	0.0583	13.1	0.278	0.995
	VG	0.263	0.104	0.0376	1.599	0.995
	LN	0.264	0.121	63.6	1.39	0.992
4	BC	0.500	-0.832	7.01	0.0241	0.963
	VG	0.505	-8.00	0.116	1.00370	0.970
	LN	0.657	0.143	144	7.44	0.946

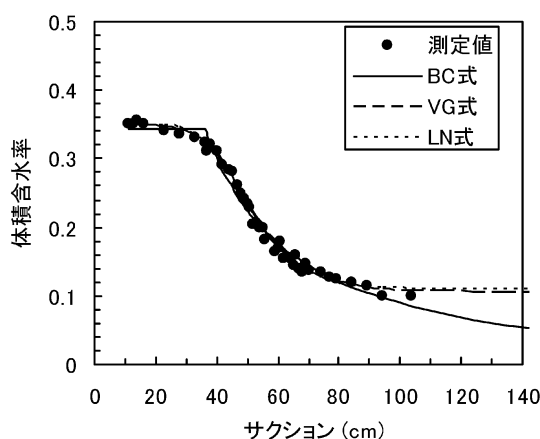
<sup>1)</sup> 試料番号は表-2<sup>2)</sup> パラメータ番号は表-1

図-3 砂質土の土壌水分特性曲線 (Haverkamp and Parlange, 1986) と、BC式、VG式、LN式による近似

Fig. 3 Soil water retention curve of sand (Haverkamp and Parlange, 1986) and fitted curves

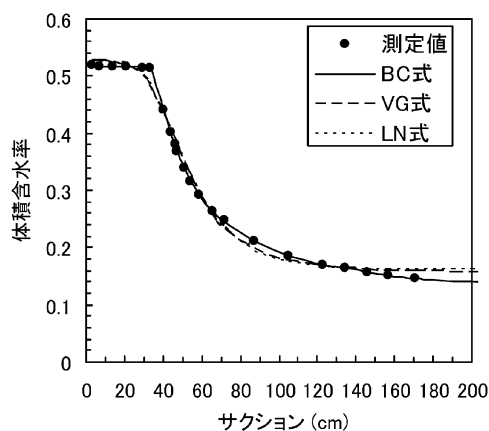


図-4 砂質ローム土の土壌水分特性曲線 (Laliberte et al., 1966) と、BC式、VG式、LN式による近似

Fig. 4 Soil water retention curve of sandy loam (Laliberte et al., 1966) and fitted curves

試料4のシルト質ローム土 (Richard et al., 1983) では、BC式、VG式、LN式ともに、測定値と近似曲線の間にずれが生じたが、DB式によって、非常に良い近似が得られた (図-6)。ここで、DB式のパラメータは  $\theta_s = 0.502$ ,  $\theta_r = 0.177$ ,  $w_1 = 0.324$ ,  $\alpha_1 = 0.0685$ ,  $n_1 = 2.01$ ,  $\alpha_2 = 4.32 \times 10^{-4}$ ,  $n_2 = 1.59$  であり、重決定係数は 0.99975 となった。BC式、VG式、LN式では、重決定係数はいずれも 0.9 以上にはなったものの、最も良い近似が得られ

たVG式の重決定係数 (0.970) が、図-3~図-5の中で最も小さい重決定係数 (0.982) よりも小さい値となった。そして、BC式とVG式において、 $\theta_r$ の値が負の値となり、「残留体積含水率」という物理的な意味はなくなった。

#### 4.3 RETC との比較

最後に、RETC (van Genuchten et al., 1991) と本プログラムの機能を比較する。RETCでは、土壌水分特性モデルとして式(5)のVGモデルを用いている。ここで、



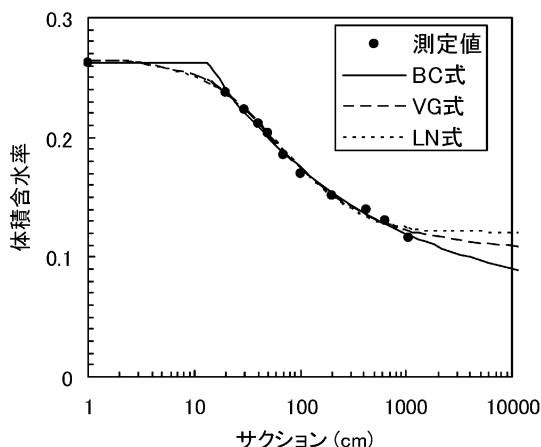


図-5 ローム砂の土壌水分特性曲線 (Dane *et al.*, 1983) と、BC 式、VG 式、LN 式による近似

Fig. 5 Soil water retention curve of loamy sand (Dane *et al.*, 1983) and fitted curves

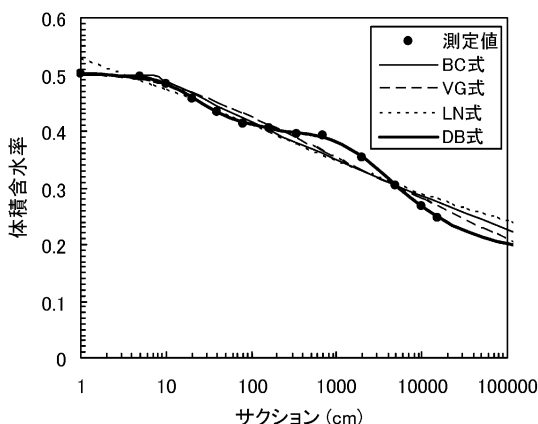


図-6 シルト質ローム土の土壌水分特性曲線 (Richard *et al.*, 1983) と、BC 式、VG 式、LN 式、DB 式による近似

Fig. 6 Soil water retention curve of silt loam (Richard *et al.*, 1983) and fitted curves

パラメータ  $m$  と  $n$  については (1)  $m$  と  $n$  それぞれが独立変数 (2)  $m = 1 - 1/n$  (3)  $m = 1 - 2/n$  (4)  $n \rightarrow \infty +$  から選ぶことができる。また、不飽和透水係数の推定に関しては、Mualem モデルを用いた式 (7) と、Burdine モデル (Burdine, 1953) から導かれた式から選ぶことができる。不飽和透水係数の推定も含まれているため、独立変数のパラメータベクトルは  $(\theta_r, \theta_s, \alpha, n, m, \tau, K_s)$  と 7 個の成分があり、最初の 5 個は式 (5) に関するパラメータ、最後の 2 個は式 (7) に関するパラメータである。非線

形回帰のアルゴリズムには、本プログラムと同様にレーベンバーグ・マルカート法が用いられている。RETc は 3 種類の計算ができる。(1) パラメータをユーザーが設定した時の関数計算。(2)  $\theta(h)$  が与えられたときの不飽和透水係数と水分拡散係数の計算。(3) 不飽和透水係数または水分拡散係数が与えられたときの  $\theta(h)$  の計算。

本プログラムと RETc を比較すると、

(1) RETc では  $\theta(h)$  から不飽和透水係数と水分拡散係数の計算をするが、本プログラムでは  $\theta(h)$  からパラメータを出力し、その後の不飽和透水曲線の計算はユーザーに任されている。しかしながら、RETc においても、不飽和透水係数の推定のためには、なんらかの方法で  $K_s$  と  $\tau$  の値を定める必要がある。

(2) RETc ではパラメータの初期値をユーザーが与える必要があるが、本プログラムでは自動的に初期値を推定する。ユーザーが条件設定を一切することなく計算が実行できるところに、本プログラムの最大の特徴がある。

(3) RETc は Windows あるいは MS-DOS 上で動作するのにに対し、本プログラムは Windows, Mac OS X, Linux, UNIX 等 GNU Octave が動作する様々な OS 上で動かすことができる。

## 5. おわりに

数値計算用言語 Octave を用いて、土壌水分特性データから土壌水分特性パラメータを計算するプログラム (swrc.m および bimodal.m) を作成した。このプログラムには、以下のような特徴がある。

(1) 代表的な 4 つの土壌水分特性モデル (BC 式、VG 式、LN 式、DB 式) に対して、レーベンバーグ・マルカート法によるパラメータの決定ができる。

(2) パラメータの初期値や増分割合の設定を自動的に行うための工夫がなされているため、多くの実験データ (UNSODA データベースのほぼすべてのデータ) に対し、パラメータの決定を自動的に行うことができる。

(3)  $\theta_s$  および  $\theta_r$  は、デフォルトではフィッティングパラメータとして扱われるが、設定を変えることにより、定数として扱うことも可能である。

(4) 得られた結果を専用のエクセルシートにコピーペーストすることで、近似曲線を確認することができる。重決定係数と近似曲線の形を見て、実験データに対して最適なモデルを選択することができる。

本論文では、土壌水分特性曲線への適合性の良さという観点からのみ、モデルの適否を論じた。透水係数推定精度の良さについては、本論文では検討対象外としたため、さらに検討が要される。

今後は、ユーザーインターフェイス及び初期値設定アルゴリズムの改良、他の土壌水分特性モデルの取り込み、不飽和透水係数推定に関する検討、等の改良を続け、より使いやすく便利なツールにしていきたいと考えている。このプログラムを研究、教育に活用していただき、より使いやすくするためのご意見をいただければ幸いである。

## 引用文献

- Brooks, R.H. and A.T. Corey (1964) : Hydraulic properties of porous media. Hydrol. Paper 3. Colorado State Univ., Fort Collins, CO, USA.
- Burdine, N.T. (1953) : Relative permeability calculations from pore-size distribution data. Petrol. Trans., Am. Inst. Min. Eng. **198** : 71-77.
- Campbell, G.S. (1974) : A simple method for determining unsaturated conductivity from moisture retention data. Soil Sci., **117** (6) : 311-314.
- Dane, J.H., D.K. Cassel, J.M. Davidson, W.L. Pollans and V.L. Quisenberry. (1983) : Physical characteristics of soils of the Southern Region -Troup and Lakeland Series. South. Coop. Ser. Bull. 262, Ala. Agric. Exp. Sta. Auburn Univ., AL.
- Durner, W. (1994) : Hydraulic conductivity estimation for soils with heterogeneous pore structure. Water Resour. Res., **30** (2) : 211-223.
- Haverkamp, E. and J.Y. Parlange (1986) : Predicting the water-retention curve from particle-size distribution : 1. Sandy soils without organic matter. Soil Sci., **142** (6) : 325-339.
- Kosugi, K. (1994) : Three-parameter lognormal distribution model for soil water retention. Water Resour. Res., **30** : 891-901.
- Kosugi, K. (1996) : Lognormal distribution model for unsaturated soil hydraulic properties. Water Resour. Res. **32** : 2697-2703.
- Kosugi, K. (1997) : New diagrams to evaluate soil pore radius distribution and saturated hydraulic conductivity of forest soil. J. For. Res. **2** : 95-101.
- Laliberte, G.E., A.T. Corey and R.H. Brooks (1966) : Properties of unsaturated porous media. Hydrol. Paper 17, Colorado State. University, Fort Collins, CO, USA.
- Marquardt, D. (1963) : An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. J. Soc. Indust. App. Math., **11** : 431-441.
- Mehta, B.K., S. Shiozawa and M. Nakano (1994) : Hydraulic properties of a sandy soil at low water contents. Soil Sci., **157** : 208-214.
- Mualem, Y.A. (1976) : A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. Water Resour. Res., **12** : 513-522.
- 中野政詩・宮崎 毅・塩沢 昌・西村 拓 (1995) : 土壌物理環境測定法. pp. 65-87, 東京大学出版会, 東京.
- Nemes, A., M.G. Shaap, F.J. Leij and J.H.M. Wösten (2001) : Description of the unsaturated soil hydraulic database UNSODA version 2.0. J. Hydrol. (Amsterdam) **251** : 151-162.
- 登尾浩助 (2004) : エクセルを使った逆解析法による土壌水理特性の推定. 土壌の物理性, **96** : 57-63.
- 大石新一 (2000) : Linux 数値計算ツール. pp. 1-5, コロナ社, 東京.
- Richard F., P. Lüscher and T. Strobel (1983) : Physikalische Eigenschaften von Böden der Schweiz, Vol. 3, Swiss Federal Institute for Forest, Snow and Landscape Research (WSL), Birmensdorf, Switzerland and Swiss Federal Institute of Technology (ETH), Zurich, Switzerland.
- van Genuchten, M. (1980) : A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Sci. Soc. Am. J. **44** : 892-898.
- van Genuchten, M., F. Leij and S. Yates (1991) : The RETC code for quantifying the hydraulic functions of unsaturated soils. Technical Report EPA/600/2-91/065, US Environmental Protection Agency.

## 付 録

土壌水分特性パラメータ計算プログラム swrc.m

```
1 #!/usr/bin/octave -qf
2 # swrc.m version 1.0
3 # http://purl.org/net/octave/
4
5 # Read data from file
6 output_precision=7;
7 load swrc.txt
8 [s, i]=sort (swrc (:, 1));
9 sorted=swrc (i, :);
10 x=sorted (:, 1); y=sorted (:, 2);
11
12 # Setting
```

```

13 thetaSin=max(y);# initial value of thetaS
14 cts=1;# cts=1;thetaS is variable, cts=0;thetaS
   is constant
15 thetaRin=min(y);# initial value of thetaR
16 ctr=1;# ctr=1;thetaS is variable, ctr=0;thetaS
   is constant
17
18 # Set initial values
19 thetaS=thetaSin;thetaR=thetaRin;
20 hbi=sum (y > max (y) * 0.95 + min (y) * 0.05) + 1;
21 hb=x (hbi);hby=(y(hbi)-thetaR)/(thetaS-thetaR);
22 if hb==0, hb=x (2)/10; , end
23 hli=sum (y > max (y) * 0.15 + min (y) * 0.85);
24 if hbi==hli;hli=hli+1; , end
25 hl=x (hli);hly=(y (hli)-thetaR)/(thetaS-thetaR);
26 lambda=-log (hly/hby)/log (hl/hb);
27 if lambda<0.1, lambda=0.1; , end
28 if lambda>10, lambda=10; , end
29
30 # Brooks and Corey Model
31 disp ("===BC model===");
32 x2=x.+(x==0).*0.001;
33 function ret=BC(x,p)
34     ret=(x>p(3)).*(p(2)+(p(1)-p(2)).*(x./p(3)).^(p
        (4)))+(x<=p(3)).*p(1);
35 endfunction
36 pin=[thetaS, thetaR, hb, lambda];
37 stol=1;wt=ones (length(y), 1);
38 dp=[0.00001*cts 0.001*ctr 0.1 0.01];R2b=0;
39 while (stol>=0.00001)
40     [f, p, kvg, itr, corp, covp, covr, std, z, R2]=leasqr
        (x2, y, pin, "BC", stol, 20, wt, dp);
41     if kvg==0, p=pin; , R2=R2b; , stol=0; , end
42     stol=stol/10;pin=p;R2b=R2;
43 endwhile
44 thetaS=p(1), thetaR=p(2), hb=p(3), lambda=p
    (4), R2
45
46 # van Genuchten Model
47 disp ("===VG model===");
48 function ret=VG(x,p)
49     n=abs (p(4))+1;
50     ret=p(2)+(p(1)-p(2)).*(1+(abs (p(3)).*x).^n).^(
        (1/n-1);
51 endfunction
52 thetaS=thetaSin;thetaR=thetaRin;
53 hm=x (sum (y > max (y)/2 + min (y)/2) + 1);
54 alpha=1/hm;n=lambda+1;
55 if n<1.1, n=1.1; , end
56 if n>10, n=10; , end
57 pin=[thetaS, thetaR, alpha, n-1];
58 stol=1;dp=[0.00001*cts 0.001*ctr 0.1 0.001];R2b=0;
59 while (stol>=0.00001)
60     [f, p, kvg, itr, corp, covp, covr, std, Z, R2]=leasqr
        (x, y, pin, "VG", stol, 20, wt, dp);
61     if kvg==0, p=pin; , R2=R2b; , stol=0; , end
62     if imag (R2)^2>0, p=pin;R2=R2b; , stol=0; , end
63     stol=stol/10;pin=p;R2b=R2;
64 endwhile
65 thetaS=p(1), thetaR=p(2), alpha=abs (p(3)), n=
    abs (p(4))+1, R2
66
67 # Lognormal Pore-Size Distribution Model of Kosugi
68 disp ("===LN model===");
69 function ret=LN(x,p)
70     ret=p(2)+(p(1)-p(2)).*(1-normcdf ((log (x/abs
        (p(3))))./abs (p(4))));
71 endfunction
72 thetaS=thetaSin;thetaR=thetaRin;hm=1/alpha;
73 sigma=1.2*(n-1)^(-0.8);
74 if sigma<0.15, sigma=0.15; , end
75 if sigma>3, sigma=3; , end
76 pin=[thetaS, thetaR, hm, sigma];
77 stol=1;dp=[0.00001*cts 0.0001*ctr 0.01 0.01];R2b=0;
78 while (stol>=0.00001)
79     [f, p, kvg, itr, corp, covp, covr, std, Z, R2]=leasqr
        (x, y, pin, "LN", stol, 20, wt, dp);
80     if kvg==0, p=pin; , R2=R2b; , stol=0; , end
81     if imag (R2)^2>0, p=pin;R2=R2b; , stol=0; , end
82     stol=stol/10;pin=p;R2b=R2;
83 endwhile
84 thetaS=p(1), thetaR=p(2), hm=abs (p(3)), sigma=
    abs (p(4)), R2

```

## 要 旨

土壌水分特性曲線の測定値から土壌水分特性パラメータを計算するプログラムを、高機能数値計算言語 GNU Octave によって開発し、フリーソフトとして公開した。このソフトは、Brooks and Corey 式, van Genuchten 式, Kosugi の間隙径対数分布式, Durner の間隙径バイモーダル分布式に対し、レーベンバーグ・マルカート法による非線形回帰を実行し、必要とされるパラメータを計算する。一般的な非線形回帰ソフトでは、ユーザーがパラメータの初期値を適切に設定する必要があるが、このプログラムでは、初期値の自動設定アルゴリズムを実装したところに、その特徴がある。不飽和土壌水文データベース UNSODA の多くのデータを用いてプログラムの検証をし、その中からいくつかの典型例について、モデルの比較および適用の際の注意点について議論した。

受稿年月日 : 2006 年 7 月 28 日

受理年月日 : 2006 年 12 月 26 日